

РАСЧЕТ ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ФОСФАТИДИЛХОЛИНА

И.С.Федулова, Р.В. Щелоков

(Город Волгоград, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Волгоградский государственный университет»,
irishka-nf@mail.ru, schelokov@mail.ru)

CALCULATION OF PHOSPHATIDYLCHOLINE OPTICAL CHARACTERISTICS

I.S.Fedulova, R.V. Schelokov

Прогресс в развитии вычислительной техники и программного обеспечения сделал методы квантовой химии одним из наиболее важных инструментов химических и физико-химических исследований. С помощью компьютерного эксперимента стало возможным исследовать переходные состояния и механизмы химических реакций, несуществующие вещества и др., что невозможно на основе имеющихся экспериментальных методов.

Элементарной единицей строения и жизнедеятельности всех живых организмов является клетка. Величину клетки и обеспечение сохранения существующих различий между клеточным содержимым и окружающей средой определяет плазматическая мембрана, основной структурой которой является бислой. Существует несколько классов мембранных липидов, однако в наибольшем количестве в мембранах присутствуют фосфолипиды.

Фосфолипиды относятся к жидким кристаллам, сочетающим в себе анизотропные свойства кристаллов и текучие свойства жидкостей. Наиболее характерным свойством жидких кристаллов является их способность изменять ориентацию молекул под воздействием электрических полей, что открывает широкие возможности для применения их в промышленности. Создание лазеров привело к возникновению новых разделов взаимодействия света с веществом, и особое место среди них занимает нелинейная оптика жидких кристаллов. Применение нелинейной оптики дает новую информацию о структуре жидких кристаллов, характере межмолекулярного взаимодействия в них и т.п. Таким образом, речь идет о нелинейной спектроскопии жидких кристаллов в самом широком смысле.

Для работы использовалась конкретная молекула фосфолипида – лецитин(рис. 1), также носит название фосфатидилхолин, для которой было необходимо реализовать следующие задачи: рассчитать силу вращения и построить график зависимости оптического вращения от частоты, nm

Фосфатидилхолины одни из самых распространенных молекул клеточных мембран. Лецитины, как и простые жиры, содержат структурные остатки глицерина и жирных кислот, но в их состав ещё входят фосфорная кислота и холин. Лецитины широко представлены в клетках различных тканей, они выполняют как метаболические, так и структурные функции в мембранах.

Основные молекулярные характеристики лецитина:

1. Полное название исследуемой молекулы 1-hexadecanoyl-2-(9z-octadecenoyl)-sn-glycero-3-phosphocholine;
2. Аббревиатура POPC, PC(16:0/18:1(9Z));
3. Молекулярная формула $C_{42}H_{82}NO_8P$;
4. Молекулярный вес 760,076;
5. Состав C 66,55% H 10.64% , N 1.85% O 16.88% P 4.09%.

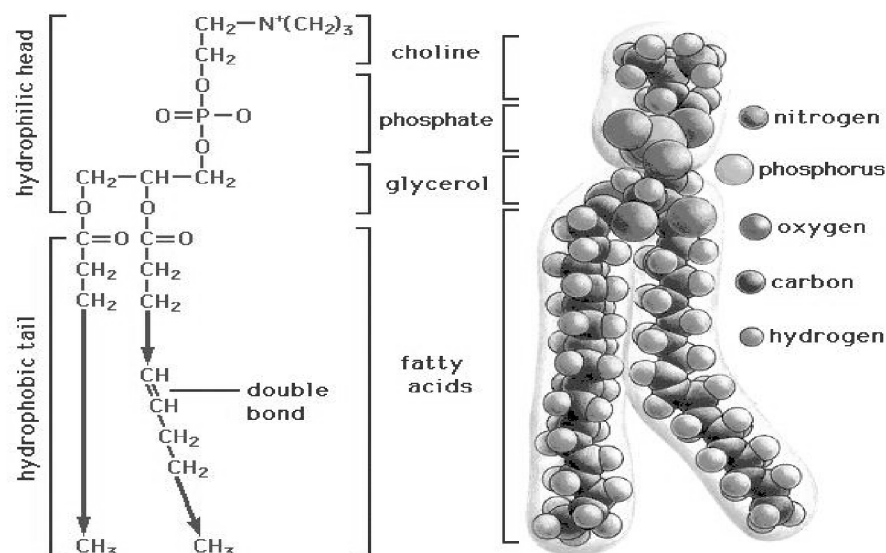


Рис. 1. Структура лецитина

Расчет был произведен с помощью квантовохимического метода Хартри-Фока с базисом STO-6G.

В результате проделанной работы были рассчитаны:

Были вычислены значения оптического вращения (Optical Rotation) и частоты (frequency) для каждого атома молекулы фосфотидилхолина. Используя полученные значения, легко можно построить зависимость оптического вращения от частоты. (рис. 2).

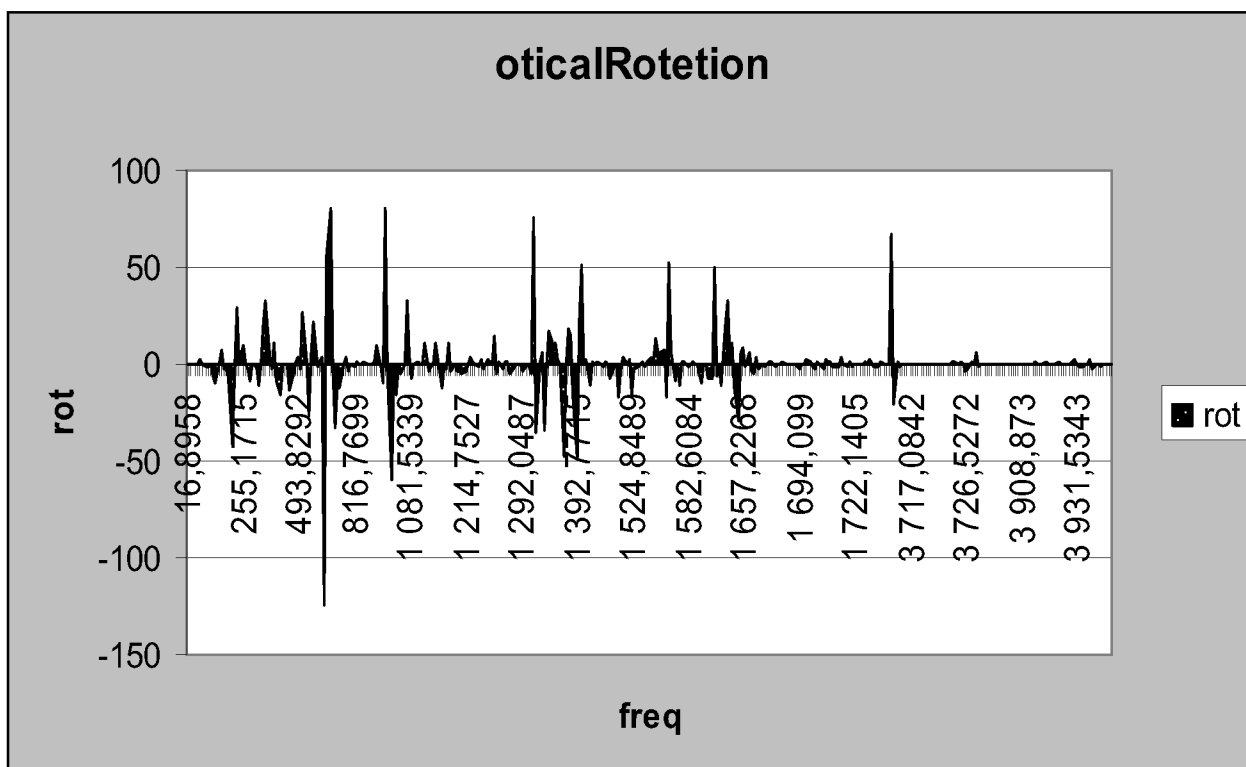


Рис. 2. График зависимости Opt(freq).

В ходе работы были также получены несколько значений вращательной постоянной Rotation constants (GHz): 0.0645309; 0.0086504; 0.0078079.

Она характеризует природу вещества и зависит от длины волны и температуры.